

Title	量子系の断熱変化と局在波動関数(基研短期研究会『少数多体系における量子カオスと関連する諸問題』,研究会報告)
Author(s)	高見, 利也
Citation	物性研究 (1992), 58(1): 77-82
Issue Date	1992-04-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/94896">http://hdl.handle.net/2433/94896</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

## 量子系の断熱変化と局在波動関数

京都大学 理学部 高見 利也

## 1. Introduction

最近、古典力学的に非可積分な系の量子力学が注目を集めており、このような量子系の固有値は互いに反発的な相互作用をすることが知られている。この相互作用は、対応する古典系にエネルギー (energy) 以外の保存量が無いことから生じ、固有値のパラメータ変化によく知られたアボイデッドクロッシング (avoided crossing) という構造を示す。このような固有値の性質は統計的な手法を使って解析され、最近接間隔分布や  $\Delta$  統計などが、系の対称性などに応じてユニバーサル (universal) に振る舞うことがわかっている。

一方、アボイデッドクロッシングにおける非断熱効果は、量子化学、原子核物理学、クラスターのダイナミクスなどの少数多体系の研究に重大な問題を引き起こしている。<sup>1,2,3</sup> 例えば、エチレンなど簡単な気体分子において、断熱近似の範囲内では説明できないイオン化スペクトラムが得られている。このような系では、原子核の運動による振動モードの存在が、電子のスペクトラムに大きな変化を引き起こしていると考えられる。このような非断熱効果の理論的研究には、*diabatic basis* が使われている。<sup>3</sup>

可積分系のアボイデッドクロッシングは、トーラス間のトンネル効果や複素軌道によって半古典的に理解される。Noid たちは、二つのトーラスに巻き付いたような古典軌道を使って、近可積分系のアボイデッドクロッシングの大きさを評価した。<sup>4</sup> しかし、彼らの研究は KAM トーラスが存在している場合に限られ、完全に非可積分な系に適用することはできない。

本研究の目的は、非可積分な系のアボイデッドクロッシングを半古典的に説明することである。完全に非可積分な系においては、次の理由から、古典周期軌道の研究が出发点として適していると考えられる。まず一つ目は、古典周期軌道は半古典極限においてエネルギーレベルに対応していることである。この対応は、次の Gutzwiller のトレース公式<sup>5</sup>で与えられる。

$$\sum_j \frac{1}{E - E_j} \approx -\frac{i}{\hbar} \sum_{\text{periodic orbits}} \frac{T_0}{2 \sinh(\alpha/2)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S - i l \frac{\pi}{2}\right) \quad (1)$$

ここで、 $T_0$  は古典周期軌道の周期、 $S$  は周期軌道の回りの作用積分、 $l$  は Maslov 指数、そして、 $\alpha$  は古典軌道の安定性から決まる数である。この公式によると、固有値のフーリエ変換はそれぞれの古典軌道に応じたピークを持ち、<sup>6</sup> その高さは軌道の安定性に対応していることがわかる。

二番目は、スカー (scar) 固有関数の存在である。<sup>7,8,9</sup> これは明らかにそれぞれの固有状態がいくつかの古典周期軌道の「重ね合わせ」で表しうるということを示している。

三番目は、位相空間全体がストカスティックな系では、エルゴード性のために周期軌道は密に存在することである。位相空間の任意の領域は、古典力学に従う実軌道によってつながれている。だから、我々はわざわざトンネル効果や複素軌道を持ち出す必要はないのである。これらの理由により、我々はアボイデッドクロッシングの起源を古典周期軌道に基づいて理解しようと試みる。つまり、可積分系においてトーラスが果たした役割を、非可積分系においては古典周期軌道が担っていると考えるのである。

以下では、まず、非可積分系の例としてスタジアムビリヤード<sup>7,10,11</sup>(stadium billiard)を使い、パラメータとしてアスペクト比<sup>7,10</sup>(aspect ratio)を変化させたときの固有値の様子と固有状態との対応関係を調べる。次に、小さなアボイデッドクロッシングの付近での scar 波動関数の振る舞いを詳しく調べ、scar の形を連続的に保つような基底を導入する。最後に、このような基底の変換を多レベルに拡張し、Gutzwiller 公式を使って解析することによりアボイデッドクロッシングの半古典的な解釈を得る。

## 2. Adiabatic Change

図 1 は、スタジアムビリヤードの固有値をアスペクト比に対してプロットしたものである。スタジアムビリヤードの固有状態の中で特徴的なものの一つに、位相空間で局在したバウンシング状態 (bouncing states) の存在があげられる。これは、スタジアムの直線部分を往復する古典軌道と関係のある固有状態で、面積を一定にしてアスペクト比を変えるとき軌道の長さの変化を反映して、図 1 では右上がりのレベル変化を示す (点線)。このような状態は、アボイデッドクロッシングの存在にもかかわらず次々と別のレベルにその性質を受け継いでいくことがわかる。

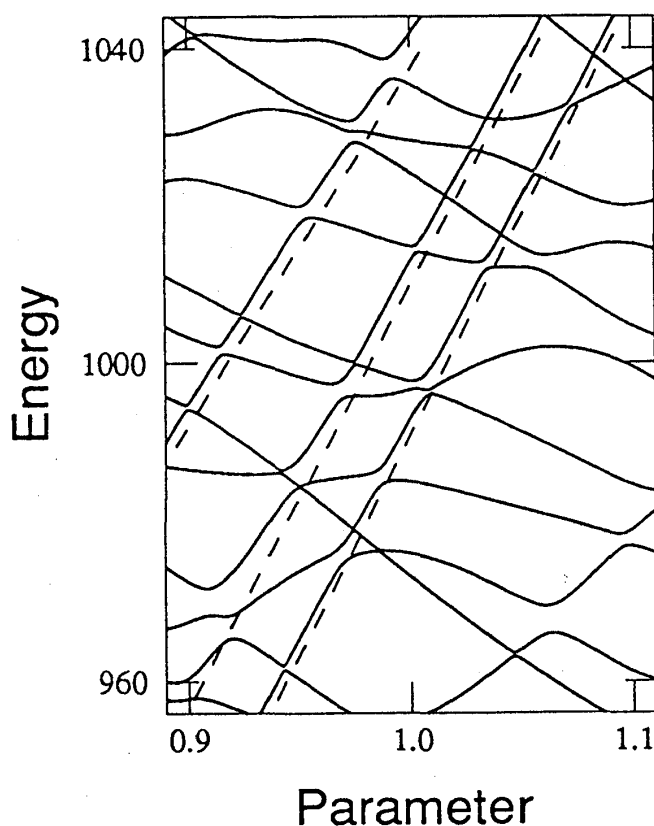


図 1 スタジアムビリヤードの (x 方向 y 方向ともに反対称な部分空間の) 固有値をアスペクト比の変化に対してプロットしたもの。ただし、スタジアムの面積は  $4 + \pi$  に規格化してある。

Bouncing state はかなり特殊な例であるから、ここからは、一般の scar 波動関数がパラメータ変化に対してどのように振る舞うかを調べることにする。図 2 は、scar 固有関数の特徴がパラメータの変化にともなってどのように変わるかを示している。それによると、波動関数の形はアポイデッドクロッシングを超えてつながっていることがわかるが、このことから、「scar に関する量は、断熱的 (adiabatic) なレベルに沿ってではなく diabatic な線に沿って連続的に変化する」ということが予想される。このような scar の性質を表現するために diabatic transformation<sup>12</sup>を導入する。

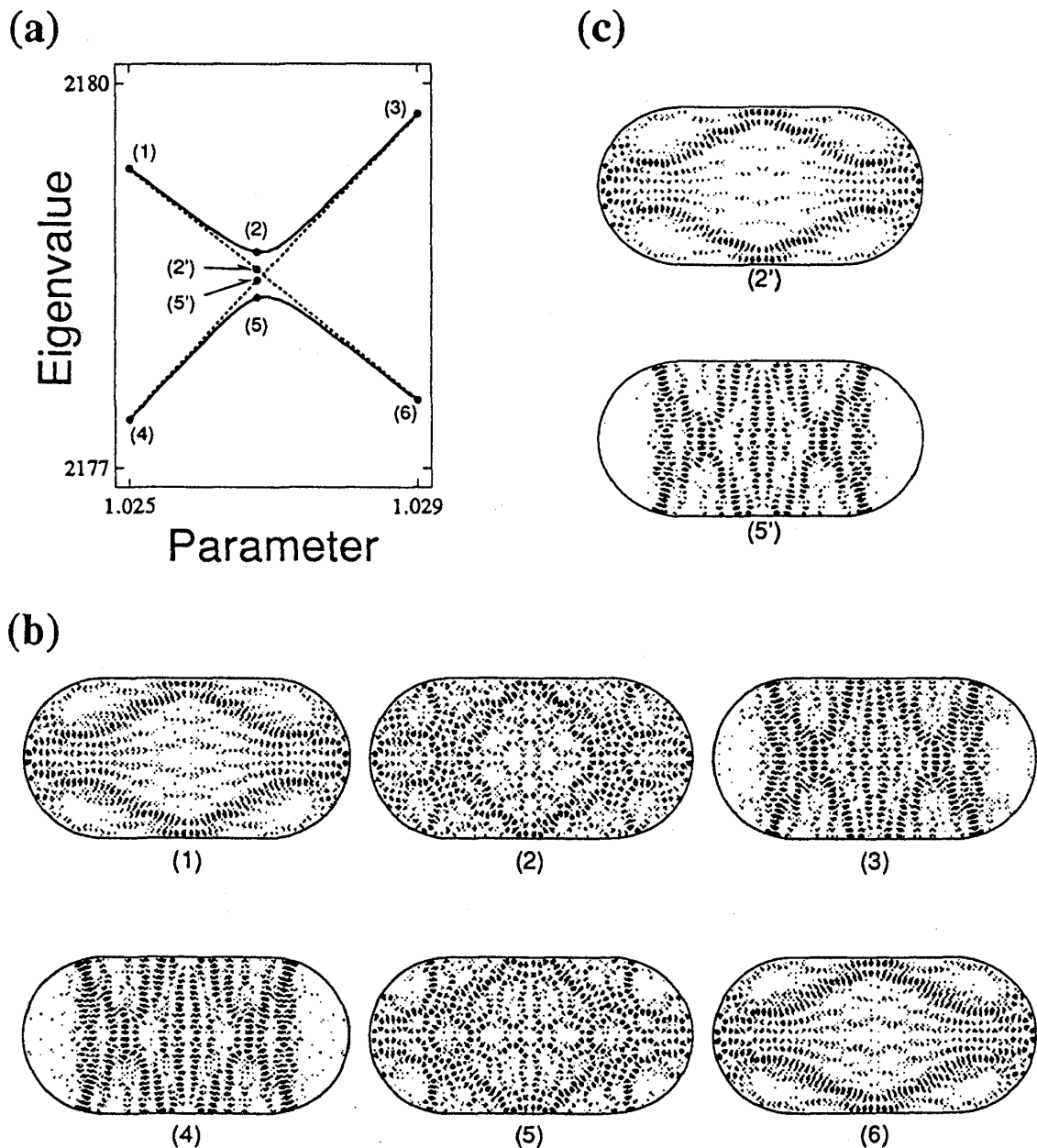


図 2 (a) 固有値のパラメータ変化に現れるアポイデッドクロッシング; (b) その周りでの固有関数の様子; (c) diabatic transformation によって得られた基底関数。

### 3. Diabatic Transformation

アボイデッドクロッシングの近くでは、ハミルトニアンは  $2 \times 2$  行列で表される。行列要素が次の条件を満たすように表示を変換する。

- i) 上下の固有値の差が最小値  $\Delta \equiv E_+(\lambda_0) - E_-(\lambda_0)$  になるパラメータの値  $\lambda = \lambda_0$  で、対角要素  $a(\lambda)$  と  $b(\lambda)$  は交差する。
- ii) 非対角要素は定数で  $\Delta/2$  に等しい。

この変換を explicit に表すと次のようになる。

$$\begin{pmatrix} a(\lambda) & \Delta/2 \\ \Delta/2 & b(\lambda) \end{pmatrix} = P(\lambda) \begin{pmatrix} E_+(\lambda) & 0 \\ 0 & E_-(\lambda) \end{pmatrix} P(\lambda)^{-1}, \quad (2)$$

ただし、

$$P(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1+S(\lambda)} & -\sqrt{1-S(\lambda)} \\ \sqrt{1-S(\lambda)} & \sqrt{1+S(\lambda)} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

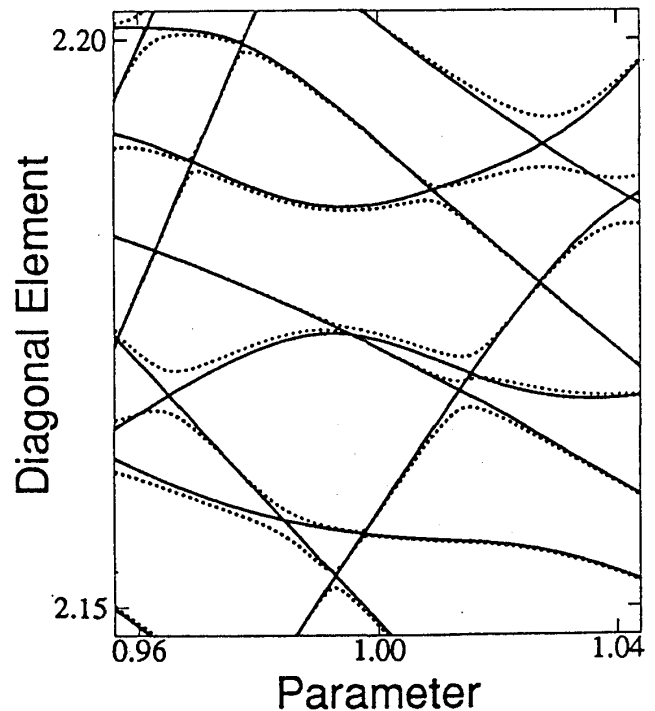
$$S(\lambda) = \text{sgn}(\lambda_0 - \lambda) \sqrt{1 - \left( \frac{\Delta}{E_+(\lambda) - E_-(\lambda)} \right)^2},$$

である。新しい表示の基底関数  $\phi_a(\lambda)$  と  $\phi_b(\lambda)$  は、固有関数  $\psi_{\pm}(\lambda)$  の線形結合で表される。

$$\begin{aligned} \phi_a(\lambda) &= \sqrt{\frac{1+S(\lambda)}{2}} \psi_+(\lambda) + \sqrt{\frac{1-S(\lambda)}{2}} \psi_-(\lambda) \\ \phi_b(\lambda) &= -\sqrt{\frac{1-S(\lambda)}{2}} \psi_+(\lambda) + \sqrt{\frac{1+S(\lambda)}{2}} \psi_-(\lambda). \end{aligned} \quad (4)$$

前ページの図 2-(a) の点線は、変換後の対角要素  $a(\lambda)$  と  $b(\lambda)$  の値を示している。また、図 2-(c) に基底関数の様子を示す。これらは、図 2-(b) の (2) と (5) から求められたものである。予想通り、scar 波動関数と同じ特徴が見られる。これらの特徴はアボイデッドクロッシングの前後で近似的に不変であると言える。それ故、これらの新しい基底を使うことが、非可積分系を半古典的に研究するのに役立つと考えられる。

図 3 表示変換後の対角要素のパラメータに対する変化(実線)。固有値の様子(点線)。



ここまでは、2レベル間のアボイデッドクロッシングだけを扱ってきたが、ここからは多数のレベルを含む場合を考える。先に導入した *diabatic transformation* をアボイデッドクロッシングが折り重なっているような場合に適用するには、アボイデッドクロッシングを持つレベルの組を、そのエネルギーギャップの小さい順に取り出して、変換していくという方法をとるのが簡単である。図3に、多数のレベルを含む場合に適用した例を示す(実線が、変換後の対角要素)。非常になめらかに変換できている様子がわかる。平均レベル間隔程度のアボイデッドクロッシングまで変換すると、多くのレベルがほとんど平行に並びアボイデッドクロッシングであることを判定することが難しくなるが、すべてのアボイデッドクロッシングが無くなるまでこの方法が続けることは、原理的には可能である。

#### 4. Fourier Transformation

量子系の固有値をフーリエ (Fourier) 変換すると、古典周期軌道の周期に応じたピーク (peak) が生じることはよく知られたことである。この性質を利用して、*diabatic transformation* (2) の半古典的な意味を考察することにする。

対角要素と固有値のそれぞれに対するフーリエ変換の比較を図4に示す。ここに示した範囲では、明らかに対角要素のフーリエ変換(実線)の方がピークが高くなっていることがわかる。この図の範囲でピークが高くなることは、もっと長い周期軌道のピークが逆に小さくなったことを意味する。断熱的なレベルに *diabatic transformation* を施すと、もともと量子系の固有値が持っていた非常に長い周期軌道の依存性がおさえられるということである。つまり、アボイデッドクロッシングの存在と長い周期軌道への依存性が一対一に対応していると考えられる。

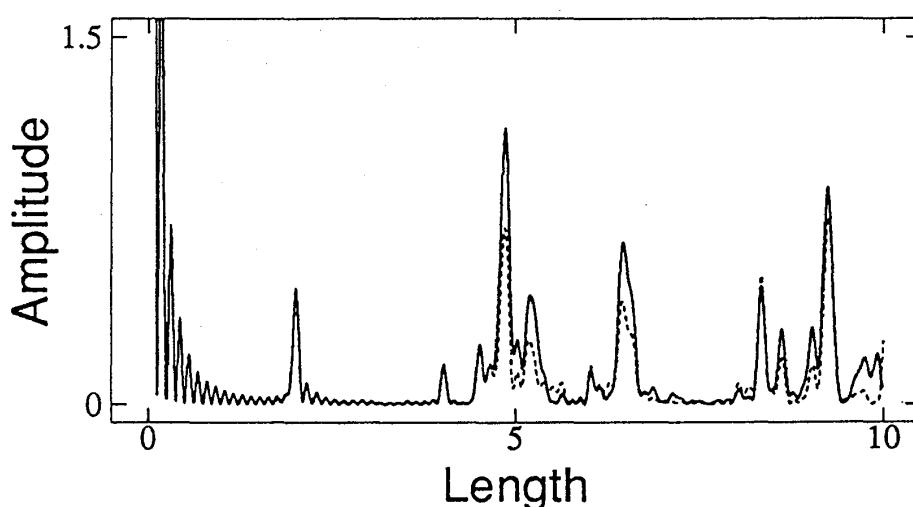


図4 変換後の対角要素のフーリエ変換(実線)、変換前の固有値のフーリエ変換。

このことを、図2の波動関数の上で見てみることにしよう。アボイデッドクロッシングから離れた場所では、固有関数は比較的短い周期軌道の周りに局在しているが、アボイデッドクロッシングの場所では複雑な形をしている。これは、波動関数が長い周期軌道と対応していることの表れである。diabatic transformationによって変換された後の基底と比較すれば、「アボイデッドクロッシングをクロスに変えると同時に長い周期軌道の異存性をおさえる」というこの変換の半古典的な意味あいを端的に読みとることができる。

## 5. Conclusion

本講演では、非可積分系のパラメータの断熱変化で生じるアボイデッドクロッシングを半古典的に説明することを試みた。その結果、アボイデッドクロッシングと長周期軌道の対応という非常に興味深い関係が示唆された。このことは非可積分量子系に対する理解を深めるだけでなく、少数多体系における非断熱遷移という大きな問題に半古典量子力学の手法を持ち込むための糸口になるのではないかと期待している。

## REFERENCES

- <sup>1</sup> J.P. Davis and P. Pechukas, J. Chem. Phys. 64, 3129 (1976); J. Hwang and P. Pechukas, *ibid.* 67, 4640 (1977).
- <sup>2</sup> H. Köppel, W. Domcke, L.S. Cederbaum and W. von Niessen, J. Chem. Phys. 69, 4252 (1978); H. Köppel, L.S. Cederbaum and W. Domcke, *ibid.* 77, 2014 (1982).
- <sup>3</sup> W. Lichten, Phys. Rev. 131, 229 (1963); F.T. Smith, *ibid.* 179, 111 (1969).
- <sup>4</sup> D.W. Noid, M.L. Koszykowski and R.A. Marcus, J. Chem. Phys. 78, 4018 (1983).
- <sup>5</sup> M.C. Gutzwiller, J. Math. Phys. 12, 343 (1971); M.C. Gutzwiller, Physica 5D, 183 (1982).
- <sup>6</sup> D. Wintgen, Phys. Rev. Lett. 58, 1589 (1987); A. Shudo and Y. Shimizu, Phys. Rev. A42, 6264 (1990).
- <sup>7</sup> E.J. Heller, Phys. Rev. Lett. 53, 1515 (1984).
- <sup>8</sup> E.B. Bogomolny, Physica D31, 169 (1988); M.V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A423, 219 (1989).
- <sup>9</sup> M. Feingold, R.G. Littlejohn, S.B. Solina and J.S. Pehling, Phys. Lett. A146, 4 (1990); B. Eckhardt, G. Hose and E. Pollak, Phys. Rev. A39, 3776 (1989); D. Wintgen and A. Hönig, Phys. Rev. Lett. 63, 1467 (1989).
- <sup>10</sup> S.W. McDonald and A.N. Kaufman, Phys. Rev. A37, 3067 (1988).
- <sup>11</sup> ビリヤード系の固有値の数値計算は、境界要素法などにより非常に高精度に行うことができる: M.V. Berry and M. Wilkinson, Proc. R. Soc. Lond. A 392, 15 (1984); P.W. O'Connor and E.J. Heller, Phys. Rev. Lett. 61, 2288 (1988).
- <sup>12</sup> Diabatic transformation は量子化学においてかなり以前から使われてきた (see Ref.2 and 3)。また、全く別の context の中でも同様の変換は使われている: C. Edmiston and K. Ruedenberg, Rev. Mod. Phys. 35, 457 (1963)。